

**Рис. 3.**  
Модель Мирового океана с разрешением  $0,25^\circ$ .  
Температура поверхности океана через 1 год  
модельного времени

показывают способность модели воспроизводить термогидродинамические процессы, достижимые только при высоком пространственном разрешении. Например, был проведен модельный эксперимент по оценке реакции океана на термодинамически неустойчивое начальное состояние: температура на поверхности была задана равной  $40^\circ\text{C}$ , на дне  $14^\circ\text{C}$ , течения нулевые. На рис. 3 показана температура поверхности океана в данном эксперименте через год модельного времени. Первичным фактором, нарушающим равновесное состояние океана, является вертикальная диффузия тепла. На шельфе, вследствие меньшего столба воды относительно глубоководных районов, перемешива-

ние приводит к формированию относительно более теплых вод и повышению уровня океана. Это, в свою очередь, приводит к возникновению градиентов плотности и уровня между шельфом и глубоководными районами и, как следствие, — к генерации течений.

Расчеты проводились на вычислительной системе МВС100к Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН. Исследования выполнялись при поддержке грантов РФФИ 08-05-01055а, 09-05-12054-офи\_м, 10-05-00782а и по проекту Программы фундаментальных исследований Президиума РАН "Фундаментальные проблемы океанологии: физика, геология, биология, экология".

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gill, A.E., 1982. Atmosphere–Ocean Dynamics, Academic press.
2. Ibrayev R.A., E. Ozsoy, C. Schrum, H.I. Sur, 2010. Seasonal variability of the Caspian Sea three-dimensional circulation, sea level and air-sea interaction. Ocean Sci., 6, 311-329.
3. Smith R. D., M. E. Maltrud, F. O. Bryan and M. W. Hecht, 2000. Numerical simulation of the North Atlantic Ocean at  $1/10^\circ$ . J. Phys. Oceanogr. V. 30, 1532-1561.

# Моделирование полупроводниковых квантовых наноустройств



## 8 Моделирование полупроводниковых квантовых наноструктур

Низкотемпературное сопротивление полупроводниковых наноструктур сложным образом зависит от деталей изготовления, внешних и внутренних полей, а также от квантовых явлений в электронной наносистеме неизвестной формы. Чтобы разобраться в этом, необходимо развивать суперкомпьютерное моделирование наноструктур. Его возможности иллюстрируются на примере исследования электрон-электронного взаимодействия в квантовом точечном контакте и эффекта Ааронова–Бома в малом кольцевом интерферометре.

### АВТОРЫ:

**О.А. Ткаченко** – ст. науч. сотрудник, Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск;

*e-mail: otkach@isp.nsc.ru*

**В.А. Ткаченко** – ст. науч. сотрудник, ИФП СО РАН;

*e-mail: vtkach@isp.nsc.ru*

**J.-C. Portal** – prof., Grenoble High Magnetic Laboratory (CNRS, France)

**З.Д. Квон** – профессор, зав. лабораторией физики и технологии структур на основе полупроводников АЗВ5, ИФП СО РАН;

*e-mail: kvon@thermo.isp.nsc.ru*

**А.В. Латышев** – чл.-корр. РАН, зав. лабораторией нанодиагностики и нанолитографии ИФП СО РАН;

*e-mail: latyshev@thermo.isp.nsc.ru*

**А.Л. Асеев** – академик, директор Института физики полупроводников СО РАН;

*email: aseev@isp.nsc.ru*

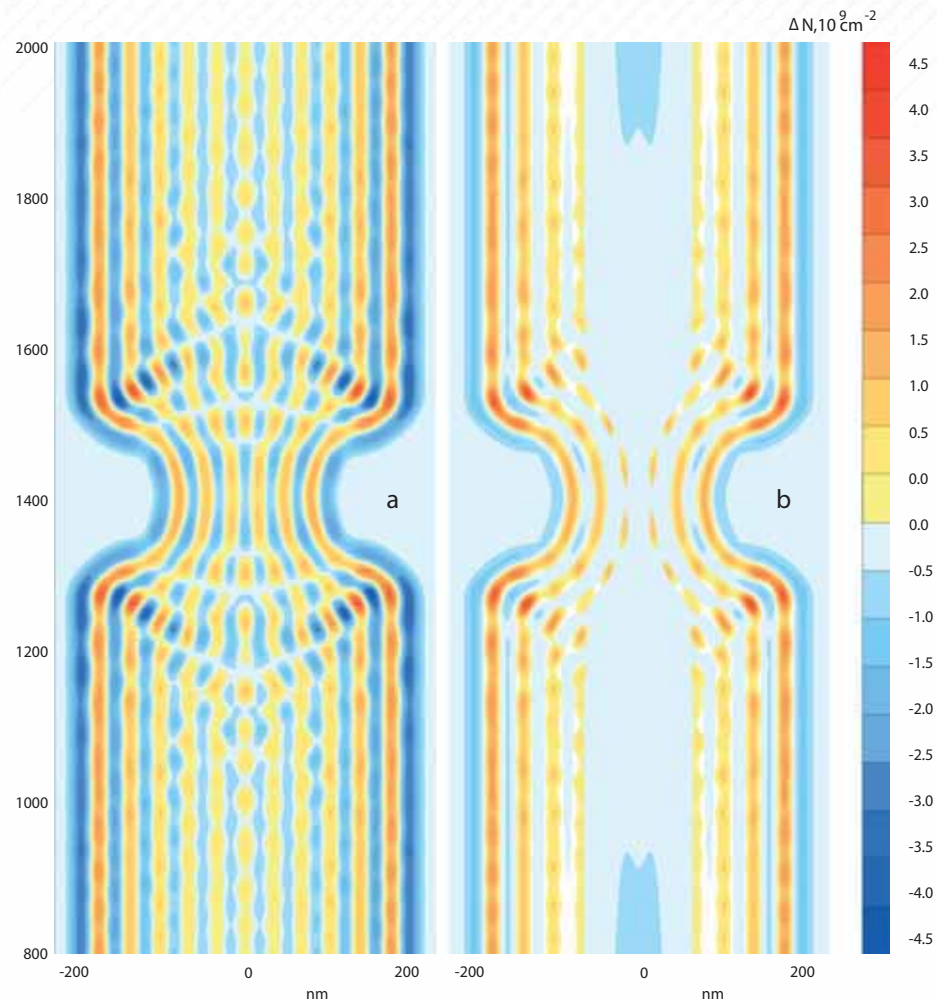
### Введение

Полупроводниковые квантовые баллистические наноструктуры интересны необычным механизмом сопротивления, которое определяется волновой функцией электрона в фигурном канале, связывающем сток-исток (электронные резервуары). Канал и резервуары создаются введением электростатических барьеров в двумерный электронный газ (ДЭГ), расположенный в глубине кристалла. На практике это выглядит следующим образом. Сначала нанолитографией и последующими операциями задают форму металлических затворов или искусственного рельефа на поверхности полупроводника, а затем, когда образец уже в криостате, задаются затворные напряжения, и все это, вместе со строением исходной гетероструктуры и самосогласованным распределением зарядов, определяет встроенные трехмерные электрические поля. Форма удерживающего потенциала остается неизвестной: контролируется лишь отклик сопротивления канала на изменение затворного напряжения, магнитного поля и температуры. Причем низкотемпературное сопротивление чувствует малейшие детали формирования наноструктуры, включая процесс замораживания заряда примесей. Цель реалистического моделирования в том, чтобы, используя данные структурной и электрофизической диагностики, вычислить форму удерживающего потенциала и отклик кондактанса на изменение внешних параметров [1]. Отклик особенно интересен, когда в нем есть новый физический эффект. Для интроскопии устройств, поиска и объяснения эффектов необходим развитый вычислительный эксперимент. В случае, если требуется очень большое число повторных расчетов, используются многопроцессорные супер-ЭВМ [2, 3]. Ниже рассмотрены два примера на данную тему.

### Рассеяние электрона на фриделевских осцилляциях

Недавно для квантового точечного контакта (сужения в высокоподвижном ДЭГ) обнаружен удивительный температурный дрейф точек фиксированного кондактанса  $N \cdot e^2/h$  ( $N > 3$ ) [2]. Этот эффект противоречит общепринятой картине независимого прохождения баллистических электронов через многомоновое сужение. Сделана попытка учесть межэлектронное взаимодействие поправкой к потенциалу в духе несамосогласованного приближения Хартри–Фока. Такая поправка по форме совпадает с фриделевскими осцилляциями электронной плотности в исходном плавном удерживающем потенциале. В работе [2] моделировался широкий канал с сужением в ДЭГ гетероперехода



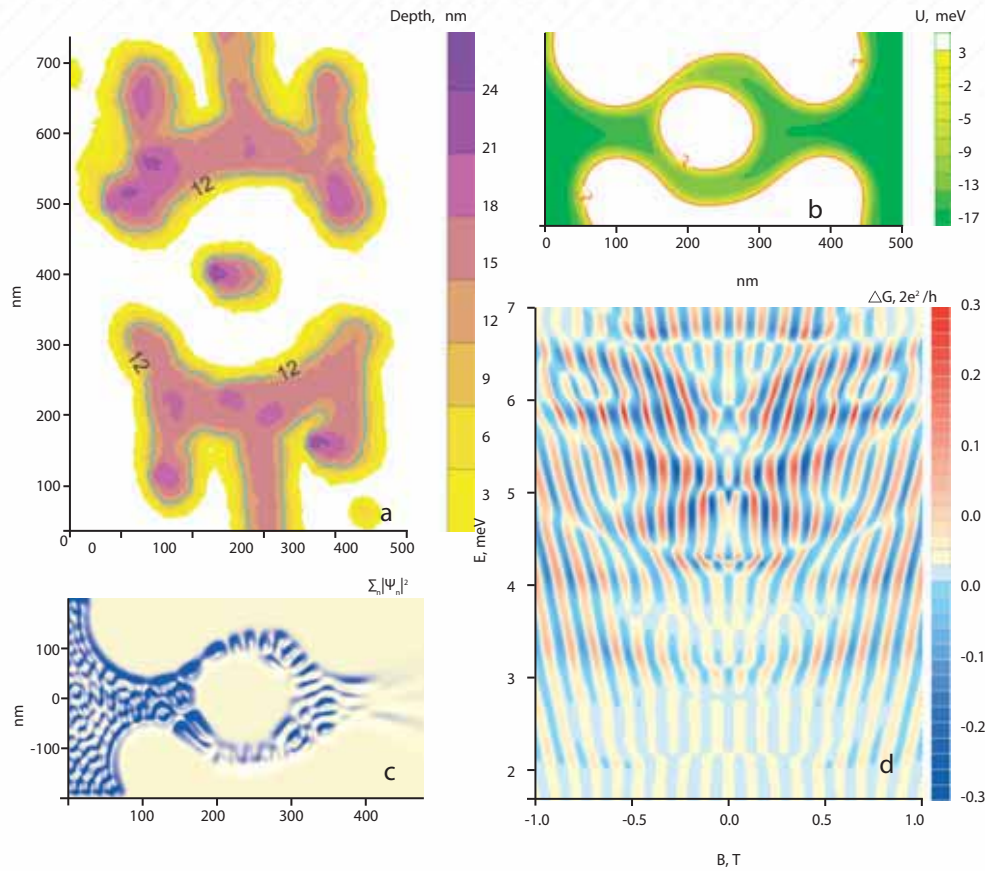


**Рис. 1.** Фриделевские осцилляции плотности  $\Delta n(T, \mu) - n(T^*, \mu)$  в канале с многомодовым сужением для  $kT = 0.03$  мэВ;  $kT^* = 0.4$  мэВ, химпотенциал  $\mu = 3.3$  мэВ. (a) – без магнитного поля, (b) – в поле  $B = 0.12$  Т

GaAs/AlGaAs. Прежде всего с малым шагом по энергии для заданных магнитных полей перпендикулярных плоскости ДЭГ были вычислены тысячи двумерных волновых функций, чтобы по ним можно было определить электронную плотность при интересующих химпотенциалах и температурах. Для примера две из многих картин фриделевских осцилляций показаны на рис. 1. Соответствующие расчеты выполнялись на машинах Сибирского суперкомпьютерного центра (Новосибирск) и суперкомпьютерного центра IDRIS (Orsay, France). Наконец, для серий поправленных эффективных потенциалов решались задачи двумерного квантового рассеяния со сканированием по энергии и усреднением коэффициента прохождения по распределению Ферми. В итоге показано, что вычисленный кондактанс сужения в канале ведет себя аналогично измеренному: в нулевом магнитном поле точки кондактанса  $N \cdot e^2/h$  сдвигаются в сторону меньшего химпотенциала с ростом температуры, и эффект подавляется магнитным полем. Подавление объясняется ослаблением фриделевских осцилляций (рис. 1). Заметим, что изучение эффектов взаимодействия в баллистических наноустройствах еще только начинается. Оно имеет большое будущее, требует новых физических моделей и развития супервычислений.

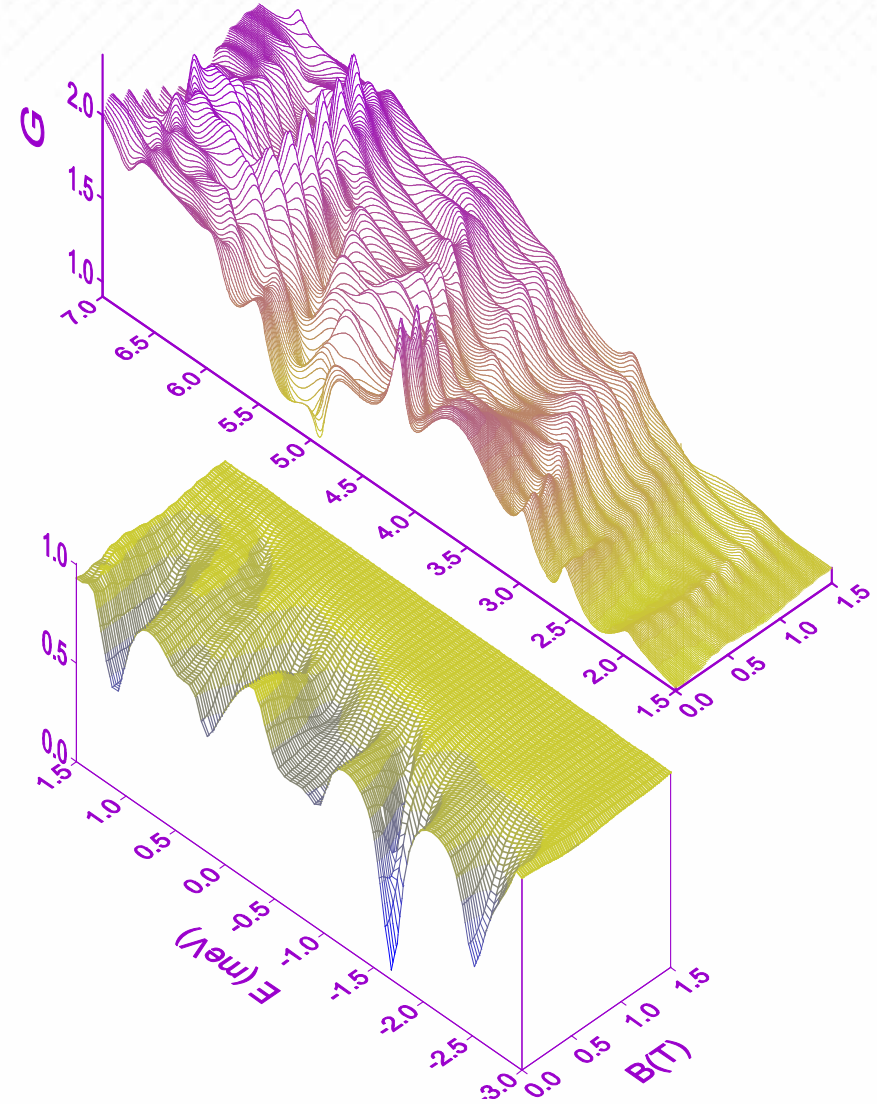
### Эффект Ааронова-Бома в малом кольцевом интерферометре

Ранее детали внешнего вида действующих наноустройств были неизвестны, поскольку имелись изображения лишь контрольных образцов, не предназначенных для измерения электрического сопротивления. Ситуация радикально изменилась при новой технологии изготовления устройств. Чтобы выяснить роль реальной геометрии, выполнено численное моделирование малого кольцевого интерферометра, изготовленного локальным анодным окислением, т. е. зондом атомного силового микроскопа (АСМ). По данным АСМ найдена глубина, на которую приближается граница раздела полупроводник–анодный окисел к ДЭГ, залегающему в 25 нм от поверхности гетероструктуры GaAs/AlGaAs (рис. 2,а). Эта граница несет отрицательный поверхностный заряд, отталкивающий электроны ДЭГ. На рис. 2,б показан сформированный таким образом эффективный потенциал в плоскости ДЭГ, найденный из решения трехмерной задачи электростатики. Далее для этого потенциала решена задача рассеяния баллистических электронов с разной энергией  $E$  при разных значениях напряженности магнитного поля  $B$ , перпендикулярного плоскости ДЭГ (рис. 2,с,д). Видно, как небольшие ошибки в задании рельефа на поверхности структуры в сглаженной форме передались удерживающему потенциалу и через



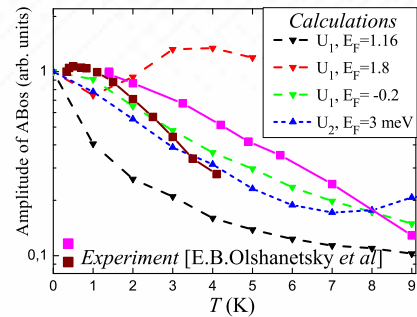
**Рис. 2.** (а) – Глубина окисления структуры; (b) – эффективный потенциал в плоскости ДЭГ; (с) – плотность вероятности для электронов, падающих слева с энергией  $E = 3$  мэВ при  $B = 0$ ; (d) – вычисленная карта осцилляций кондуктанса интерферометра с изменением  $E, B$

него волновой функции баллистического электрона (рис. 2,b,c). В свою очередь расширения на входе в кольцо и асимметрия кольца привели к сложному поведению амплитуды и, что неожиданно, фазы осцилляций Ааронова–Бома (АБ) в пределе нулевой температуры (рис. 2,d). Существенно, что после усреднения коэффициента прохождения по распределению Ферми открывается еще более удивительный эффект – флуктуации формы температурной зависимости ампли-



**Рис. 3.** Коэффициент прохождения баллистического электрона через интерферометр в зависимости от  $E, B$ , т.е. кондуктанс интерферометра в единицах  $2e^2/h$  при нулевой температуре. Верхний график является продолжением нижнего. Широкий интервал по  $E$  необходим для усреднения по распределению Ферми при температурах от 0 до 15 К





**Рис. 4.** Вычисленные и измеренные температурные зависимости амплитуды осцилляций Ааронова-Бома.  $U_1$ ,  $U_2$  – реализации потенциала, отвечающие небольшому (10%) изменению коэффициента связи глубины травления с измеренной высотой рельефа локального анодного окисления.  $E_F$  – значения химпотенциала. Экспериментальные зависимости измерены в разных криостатах, т.е. отвечают разным распределениям заряда на примесях в слоях легирования

(блок 1.10) и Программой Президиума РАН №21 "Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов" (проект 1.13.6).

туды осцилляций АБ с изменением химпотенциала [3]. Нестабильность темпа теплового подавления осцилляций действительно обнаружена в измерениях с данной структурой [3]. Заметим, что в основе объяснения эффекта лежало решение задачи двумерного квантового рассеяния для 150 000 пар ( $E$ ,  $V$ ), что требовало 6 часов счета на 64 процессорах машины Zahir суперкомпьютерного центра IDRIS (France, <http://www.idris.fr>). Соответствующее время для решения аналогичной задачи на настольном компьютере было в 300 раз больше.

Дальнейшая работа в обозначенном направлении поддержана Интеграционным проектом ИП-26 СО РАН

## Вычисления в теории чисел и криптографии

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ткаченко О.А., Ткаченко В.А., Кwon З.Д., Латышев А.В., Асеев А.Л. Интроскопия квантовых наноэлектронных устройств // Российские нанотехнологии. 2010. Т. 5, № 9–10. С. 93–103.
2. Renard V.T., Tkachenko O.A., Tkachenko V.A., Ota T., Kumada N., Portal J.C., Hirayama Y. Boundary-Mediated Electron-Electron Interactions in Quantum Point Contacts // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 100. P. 186801-1–186801-4.
3. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Baksheev D. G., Portal J.-C. Mesoscopic behavior of Aharonov-Bohm effect in small ring interferometer / Proc. 13th Intl. Symp. Nanostructures: Physics and Technology (St. Petersburg, 2005.). P. 205–206; Olshanetsky E.B., Tkachenko V.A., Tkachenko O. A., Kwon Z.D., Renard V., Scheglov D.V., Latyshev A.V., Portal J.C. The effect of microscopic state of a ballistic ring on the Aharonov–Bohm oscillations temperature dependence / Workbook of 16th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics (Tallahassee, USA, 2004) rep. ThP23.